

LQES	LQES INDEX
	<p style="text-align: center;"><b>Retículos Cristalinos e Grupos Espaciais Cristalográficos</b></p> <p style="text-align: center;"><i>Editoria do LQES Website</i></p>

### Considerações Gerais

As celas unitárias dos sete sistemas cristalinos são descritas na Tabela 1 deste LQES Index. São empregadas as notações habituais (e recomendadas), ou seja:  $a$ ,  $b$  e  $c$  para designar os parâmetros da cela unitária;  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  para designar os ângulos, respectivamente, entre os eixos  $b$  e  $c$ ,  $c$  e  $a$  e  $a$  e  $b$ .

Quando a cela unitária possui unicamente nós nos vértices, é chamada *primitiva*, sendo denotada pela letra **P** (exceção feita ao sistema romboédrico, em que é empregada a letra **R**). Aos retículos **P**, juntam-se os sete sistemas *não-primitivos*, que possuem a mesma simetria, mas que comportam diversos nós na cela unitária: são os retículos de corpo centrado, denominados **I**, os retículos de faces centradas, **F**, e os retículos de bases centradas **A**, **B** ou **C**, estes últimos, segundo a natureza das faces que têm um nó em seu centro. Todo este conjunto constitui o que é conhecido como “**14 Retículos de Bravais**”, apresentados na Figura 1 (página 4).

Os cristais podem ser classificados segundo os **grupos pontuais** de operações de simetria que une suas faces. Estes grupos são em número de 32, e estão reunidos nas colunas 2 e 3, da Tabela 2 (página 3 em diante). Dois tipos de símbolos são utilizados para designar tais grupos: os símbolos internacionais (chamados também de notação de **Hermann-Mauguin**), em notação reduzida, e os símbolos de **Schoenflies** (notação de Schoenflies).

Observe-se que não apenas os símbolos utilizados em cristalografia são diferentes daqueles da teoria de grupos. Também para o caso do eixo de rotação impróprio, a operação não é a mesma. Para a cristalografia, esta operação é definida como um eixo impróprio, de ordem  $n$  ( $\bar{n}$ , diz-se  $n$  barra), ou seja: uma rotação ao redor deste eixo, seguida de uma inversão em relação a um centro situado sobre o mesmo. No caso da espectroscopia, esta operação é definida como sendo um eixo de ordem  $n$  ( $S_n$ , diz-se **S** índice  $n$ ), no qual a rotação é seguida de uma reflexão através de um plano perpendicular a este eixo.

Uma vez que as operações de simetria de cada um dos 32 grupos pontuais cristalográficos são aplicadas aos 14 Retículos de Bravais, resultam em **230 grupos espaciais** que descrevem,

de maneira unívoca, todo arranjo de objetos idênticos, dispostos num retículo periódico infinito. Pode-se considerar que os 230 grupos espaciais são gerados pela adição de dois novos tipos de operações de simetria, àquelas encontradas nos grupos pontuais. Os elementos de simetria complementares são os eixos helicoidais (“eixos parafuso”) e os planos de deslizamento.

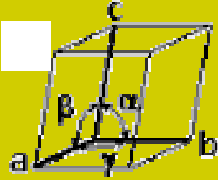
A operação de simetria correspondente a um eixo helicoidal de ordem  $n$ , consiste numa rotação de  $2\pi/n$ , ao redor de um eixo de ordem  $n$ , seguida de uma translação de  $1/n$  vezes a cela unitária, paralelamente a este eixo. A notação desta operação é  $n_1/n$ .

A operação correspondente a um plano de deslizamento consiste numa reflexão neste plano, seguida de translação executada paralelamente ao plano. Tal translação pode ser feita somente ao longo dos eixos (plano de deslizamento  $a$ ,  $b$  ou  $c$ ; valor da translação  $a/2$ ,  $b/2$  ou  $c/2$ ). Caso seja ao longo das diagonais das faces (plano de deslizamento  $n$ ), o valor da translação será de  $(a+b)/2$ ,  $(b+a)/2$  ou  $(c+a)/2$ .

Os 230 grupos espaciais são apresentados na última coluna da Tabela 2 (página 3 em diante). Uma descrição completa dos grupos espaciais cristalográficos é feita na International Tables for X-Ray Crystallography <sup>[1]</sup>.

Para cada um dos 32 grupos pontuais, o difratograma de raios X é característico de um grupo de simetria denominado Grupo de Laue, obtido ao se adicionar a este grupo pontual (mesmo que ele não seja centrosimétrico) um centro de simetria. Os 11 grupos de Laue assim definidos estão separados, por uma linha horizontal, na Tabela 2 (página 4 em diante).

Tabela 1. Celas unitárias dos sete sistemas cristalinos.

Sistema Cristalino	Características das Celas Unitárias 	Número de Retículos Celas de Bravais	Tipos de Retículos Celas de Bravais
Triclínico	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	1	P
Monoclínico	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ; \beta \neq 90^\circ$	2	P C
Ortorrômbico	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	4	P C I F
Tetragonal	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	2	P I
Romboédrico	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ \text{ e } \neq 90^\circ$ ou $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 120^\circ$	1	R
Hexagonal	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \text{ e } \gamma = 120^\circ$	1	P
Cúbico	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	3	P I F

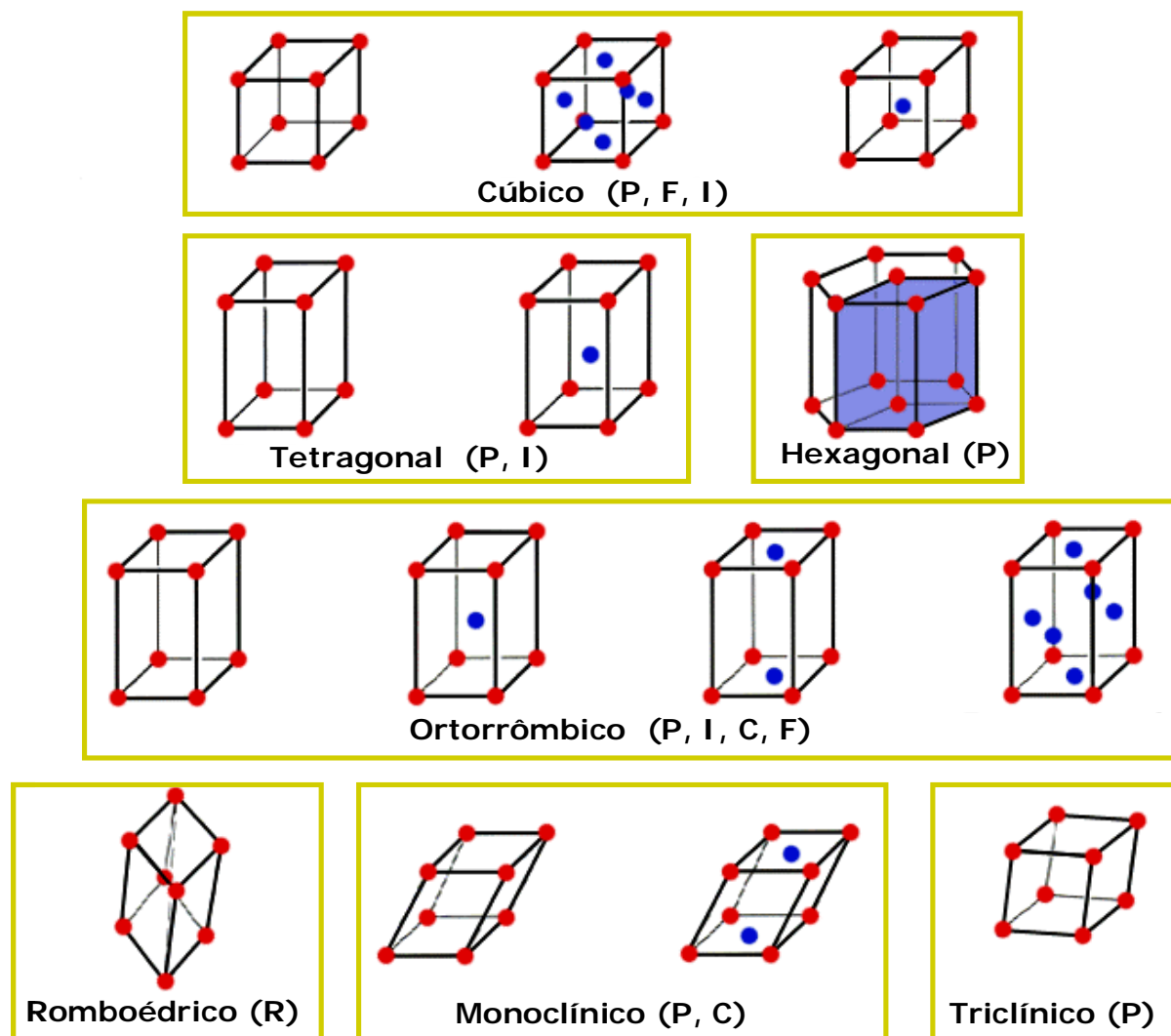


Figura 2. Retículos de Bravais.

Tabelas 2. Sistema cristalino, grupos pontuais, grupos espaciais e Grupos de Laue.

Sistema	Grupos Pontuais		Grupos Espaciais					
	Símbolo Internacional	Símbolo de Schoenflies						
Hexagonal	6	$C_6$	P6	$P6_1$	$P6_5$	$P6_2$	$P6_4$	$P6_3$
	$\bar{6}$	$C_{3h}$	$P\bar{6}$					
	6/m	$C_{6h}$	$P6/m$	$P6_3/m$				
	622	$D_6$	$P622$	$P6_122$	$P6_522$	$P6_222$	$P6_422$	$P6_322$
	6mm	$C_{6v}$	$P6mm$	$P6cc$	$P6_3cm$	$P6_3mc$		
	$\bar{6}m2$	$D_{3h}$	$P\bar{6}m2$	$P\bar{6}c2$	$P\bar{6}2m$	$P\bar{6}2c$		
	6/mmm	$D_{6h}$	$P6/mmm$	$P6/mcc$	$P6_3/mcm$	$P6_3/mmc$		

Sistema	Grupos Pontuais		Grupos Espaciais					
	Símbolo Internacional	Símbolo de Schoenflies						
Cúbico	23 m3	T T <sub>h</sub>	P23 Pm3 Ia3	F23 Pn3	I23 Fm3	P2 <sub>1</sub> 3 Fd3	I2 <sub>1</sub> 3 Im3	Pa3
	432	O	P432 P4 <sub>1</sub> 32	P4 <sub>2</sub> 32 I4 <sub>1</sub> 32	F432	F4 <sub>1</sub> 32	I432	P4 <sub>3</sub> 32
	$\bar{4}3m$ m3m	T <sub>d</sub> O <sub>h</sub>	P $\bar{4}3m$ Pm3m Fd3m	F $\bar{4}3m$ Pn3n Fd3c	I $\bar{4}3m$ Pm3n Im3m	P $\bar{4}3n$ Pn3m Ia3d	F $\bar{4}3c$ Fm3m	I $\bar{4}3d$ Fm3c

Sistema	Grupos Pontuais		Grupos Espaciais					
	Símbolo Internacional	Símbolo de Schoenflies						
Tetragonal	4 $\bar{4}$ 4/m	C <sub>4</sub> S <sub>4</sub> C <sub>4h</sub>	P4 P $\bar{4}$ P4/m	P4 <sub>1</sub> I $\bar{4}$ P4 <sub>2</sub> /m	P4 <sub>2</sub> P4/n	P4 <sub>3</sub> P4 <sub>3</sub> /n	I4 I4/m	I4 <sub>1</sub> I4 <sub>1</sub> /a
	422	D <sub>4</sub>	P422 P4 <sub>3</sub> 22	P42 <sub>1</sub> 2 P4 <sub>2</sub> 2 <sub>1</sub> 2	P4 <sub>1</sub> 22 I422	P4 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 I4 <sub>1</sub> 22	P4 <sub>2</sub> 22	P4 <sub>2</sub> 2 <sub>1</sub> 2
	4mm	C <sub>4v</sub>	P4mm P4 <sub>2</sub> mc	P4bm P4 <sub>2</sub> bc	P4 <sub>2</sub> cm I4mm	P4 <sub>2</sub> nm I4cm	P4cc I4 <sub>1</sub> md	P4nc I4 <sub>1</sub> cd
	$\bar{4}2m$	D <sub>2d</sub>	P $\bar{4}2m$ P $\bar{4}b2$	P $\bar{4}2c$ P $\bar{4}n2$	P42 <sub>1</sub> m I $\bar{4}m2$	P42 <sub>1</sub> c I $\bar{4}c2$	P4m2 I $\bar{4}2m$	P $\bar{4}c2$ I $\bar{4}2d$
	4/mmm	D <sub>4h</sub>	P4/mmm P4/nmm P4 <sub>2</sub> /mbc I4 <sub>1</sub> /amd	P4/mcc P4/ncc P4 <sub>2</sub> /mnm I4 <sub>1</sub> /acd	P4/nbm P4 <sub>2</sub> /mmc P4 <sub>2</sub> /nmc	P4/nnc P4 <sub>2</sub> /mcm P4 <sub>2</sub> /ncm	P4/mbm P4 <sub>2</sub> /nbc I4/mmm	P4/mnc P4 <sub>2</sub> /nnm I4/mcm

Sistema	Grupos Pontuais		Grupos Espaciais					
	Símbolo Internacional	Símbolo de Schoenflies						
Trigonal	3 $\bar{3}$	C <sub>3</sub> S <sub>6</sub>	P3 P $\bar{3}$	P3 <sub>1</sub> R $\bar{3}$	P3 <sub>2</sub>	R3		
	32	D <sub>3</sub>	P312 R32	P321	P3 <sub>1</sub> 12	P3 <sub>1</sub> 21	P3 <sub>2</sub> 12	P3 <sub>2</sub> 21
	3m $\bar{3}m$	C <sub>3v</sub> D <sub>3d</sub>	P3m1 P $\bar{3}1m$	P31m P $\bar{3}1c$	P3c1 P $\bar{3}m1$	P31c P $\bar{3}c1$	R3m R $\bar{3}m$	R3c R $\bar{3}c$

Sistema	Grupos Pontuais		Grupos Espaciais					
	Símbolo Internacional	Símbolo de Schoenflies						
Triclínico	1 $\bar{1}$	C <sub>1</sub> C <sub>i</sub>	P1 P $\bar{1}$					

Sistema	Grupos Pontuais		Grupos Espaciais						
	Símbolo Internacional	Símbolo de Schoenflies							
Mono-clínico	2	$C_2$	P2	$P2_1$	C2				
	m	$C_s$	Pm	Pc	Cm	Cc			
	2/m	$C_{2h}$	P2/m	$P2_1/m$	C2/m	P2/c	$P2_1/c$	C2/c	

Sistema	Grupos Pontuais		Grupos Espaciais						
	Símbolo Internacional	Símbolo de Schoenflies							
Orto-rômbico	222	$D_2$	P222	$P222_1$	$P2_12_12$	$P2_12_12_1$	$C222_1$	C222	
			F222	$I222$	$I2_12_12_1$				
			Pmm2	$Pmc2_1$	Pcc2	Pma2	$Pca2_1$	Pnc2	
	mm2	$C_{2v}$	Pmn2 <sub>1</sub>	Pba2	Pna2 <sub>1</sub>	Pnn2	Cmm2	Cmc2 <sub>1</sub>	
			Ccc2	Amm2	Abm2	Ama2	Aba2	Fmm2	
			Fdd2	Imm2	Iba2	Ima2			
	mmm	$D_{2h}$	Pmmm	Pnnn	Pccm	Pban	Pmma	Pnna	
			Pmna	Pcca	Pbam	Pccn	Pbcm	Pnnm	
			Pmnn	Pbcn	Pbca	Pnma	Cmcm	Cmca	
			Cmmm	Cccm	Cmma	Ccca	Fmmm	Fddd	
			Immm	Ibam	Ibca	Imma			

## BIBLIOGRAFIA

[1] International Tables for X-Ray Crystallography: The Kynoch Press (1969) e edições mais recentes.